

VII. 生命物理グループ

メンバー

教授	重田 育照
助教	庄司 光男
助教	栢沼 愛 (計算科学研究センター専任)
研究員	原田 隆平 (学術振興会特別研究員)
研究員	佐藤 竜馬
研究員	鬼頭 宏任
研究員	Bui Thi Kieu My
学生	大学院生 2 名、学類生 3 名

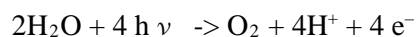
【1】. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 28 年度では、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)の反応機構の解明、宇宙空間におけるヒダントイン及びアミノ酸生成機構の解明、分子動力学シミュレーションによる細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析、紫外線損傷 DNA におけるフッリピング機構の理論的研究について研究が大きく進展した。

【2】. 研究成果

(1) 光化学系 II 酸素発生中心(OEC)の反応機構についての理論的研究

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに効率的に変換するシステムであり、生命が作り上げた洗練された化学反応系とも言える。光合成反応は巨大な蛋白質複合体内で行われ、一連の化学反応：光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成が行われる。電子伝達を担う光化学系 II では水を分解し、酸素分子を発生する以下の反応を触媒している。



この反応では化学的に安定な水から電子を引き抜いて(酸化して)いる事から分かるように、極めて難しいため、多くの反応制御がなされていると考えられる。そのため、これらの反応機構を明らかにする事は、生化学的重要性のみならず人工光合成の有益な設計指針を与えるものと期待される。

今年度は最も初めの化学反応過程である $\text{S}_2 \rightarrow \text{S}_3$ 遷移について量子古典混合(QM/MM)法を用いて理論解析を進めた。本過程は水分子が挿入するかどうかで反応過程が大きく変わる。また、 S_3 構造は研究開始当初は不明であったため(2017 年 3 月に沈

先生らにより報告される)、両可能性について理論的に検討した。まず、水が挿入されない場合では可能なスピン状態解析を行い、 S_3 状態後の OO 結合形成時での反応性の検討を行った。水分子が挿入する場合については、 S_3 状態 で OO 結合形成を行う場合と、 S_4 状態 になってから OO 結合を形成する場合についてそれぞれの機構を検討した。 S_3 状態 できとりうる可能な中間体の構造と相対安定性について網羅的に理論解析をおこなった。 $S_2 \rightarrow S_3$ に続く $S_3 \rightarrow S_4$ 反応 に関しても既に理論研究を進展させており、様々な OO 結合形成経路 (プロトン移動経路、プロトン化状態、 OO 結合形成機構) について理論検討を行った。酸素放出経路についても理論計算を完了しており、現在論文投稿中である。酸素発生機構は多くの仮定の上に組み立てられており、まだ多くの検討すべき状況が残されている。そのため、結晶構造、EXAFS, 分光実験結果と整合性を吟味しながら、全ての可能性を検討していく事が重要である。例えば酸素結合過程に関してはラジカルカップリング機構とは異なり、非断熱電子移動によって OO 結合が形成される可能性について指摘した。

また、活性中心のコンフォメーション自由度を取り込んだ、自由エネルギーでの議論を行えるように、計算プログラムを整備している。それにより、これまでの膨大な実験結果とより対応させることが可能となり、PSII の酸素発生機構が急速に明確になると期待される。

(2) 宇宙空間におけるヒダントイン及びアミノ酸生成機構の解明

宇宙空間におけるアミノ酸の生成機構に関しては、様々な反応経路が提唱されているが、本研究では、Bücherer-Bergs 反応によりアミノアセトニトリルからヒダントインが生成し、ヒダントインが加水分解されることで、最も単純な構造を持つアミノ酸であるグリシンが生成する経路 (図 1) を、量子化学計算を用いて解析した。アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出されているなど、どちらも宇宙化学において重要な分子である。

密度汎関数法 (DFT、Density Functional Theory) を用い、汎関数は B3LYP、基底関数は 6-31G*として計算を行った。星間ダスト上の氷表面の影響を検証する為、触媒として働く水分子がない場合と 1 個、さらに 2 個存在する場合について、反応障壁の高さを比較した。

図 2 に、水分子なしの場合と水分子を一つ考慮した場合の反応エネルギープロファイルを示した。今回検証した反応経路における 9 つの遷移状態の中で、最も反応障壁が高い反応は、触媒となる水分子なし及び一個を考慮した場合で、それぞれ $71.5 \text{ kcal mol}^{-1}$ 及び $56.1 \text{ kcal mol}^{-1}$ となり、水分子を考慮することで、 15 kcal mol^{-1} 反応障壁が減少した。

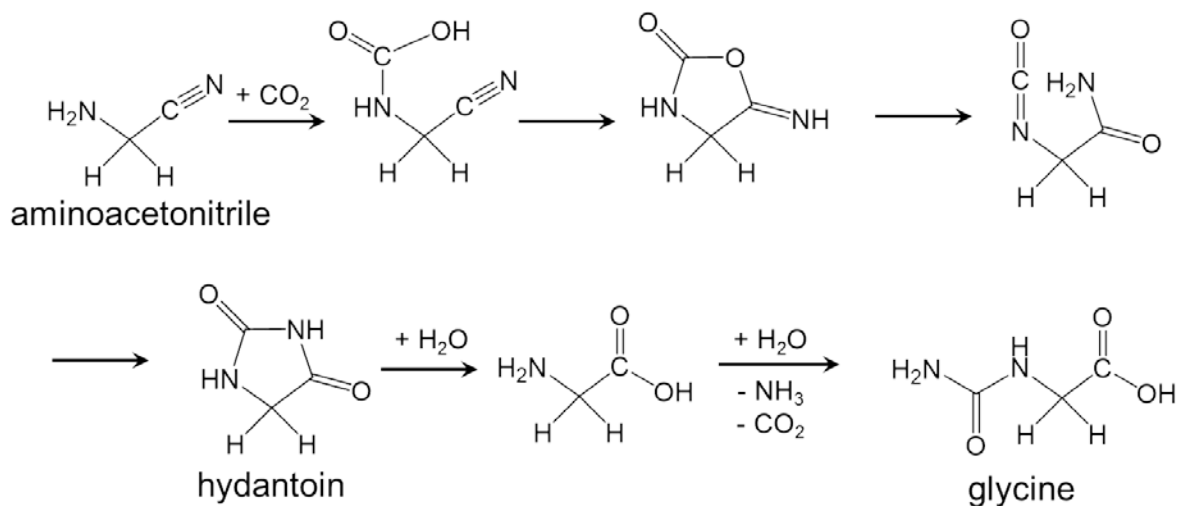


図1 ヒダントインを経由するグリシン生成経路

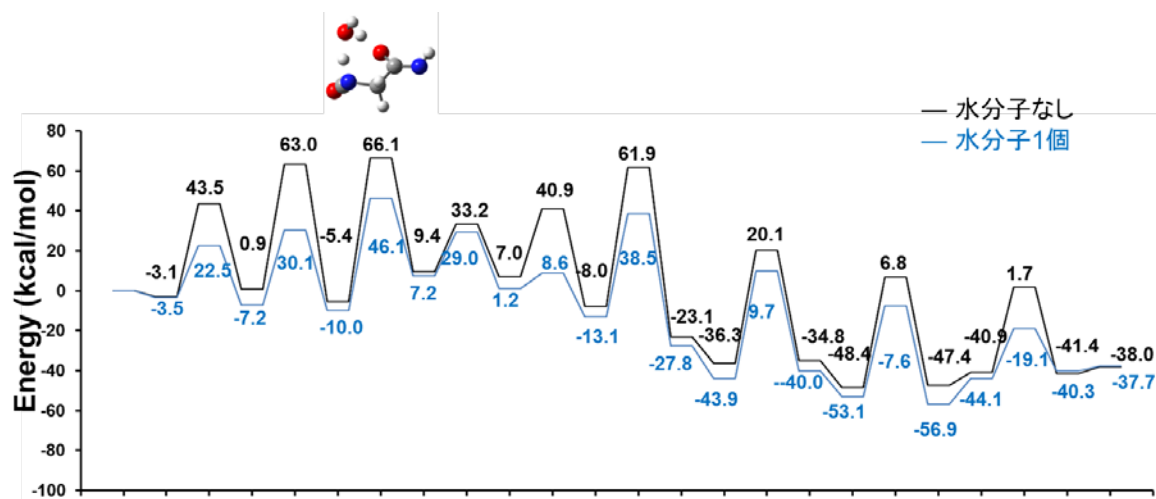


図2 ヒダントインを経由するグリシン生成経路の反応エネルギープロファイル

さらに、触媒となる水分子を2個に増やした場合では、障壁は $46.9 \text{ kcal mol}^{-1}$ にまで減少した。このことから、本反応において、触媒となる水分子の重要性、即ち、星間ダスト上の氷表面の重要性が示された。しかし、反応障壁は依然として高いことから、更なる解析を進めている。

(3) 分子動力学シミュレーションによる細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析

細菌の細胞分裂タンパク質 FtsZ は、図3に示す様に細胞膜の内側にリング状のフィラメント (Zリング) を形成し、ダイナミックに離合集散を繰り返すことで細胞膜に陥入を生じさせる。この細胞膜の陥入はZリングの収縮により起きると考えられるが、その分子メカニズムには未解明な部分が多い。平成28年度は、立命館大学・松村教授の研

究グループが X 線構造解析により決定した黄色ブドウ球菌 FtsZ の結晶構造をもとに、全原子の分子動力学シミュレーションを実行し、細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析を行った。大変興味深いことに、X 線結晶構造解析から同一結晶中に立体構造が大きく異なる FtsZ が 2 状態(T-状態と R-状態)存在していることが分かった。同一種で状態の異なる 2 構造が得られた例はこれまでになく大変貴重な実験結果であるため、T-R 状態間の構造遷移経路の探索を行い細胞分裂タンパク質の動的秩序過程の解析を行った。一般的に、生体機能に関係する大規模な構造遷移を分子動力学シミュレーションにより再現するためには、極めて長時間のシミュレーション時間が必要になる。この問題に対して、出来るだけ短時間かつ効率的に重要な構造変化を再現するためには、何らかの構造サンプリング手法を適用する必要がある。本研究では、研究室で開発しているタンパク質の構造サンプリング法の中から、レアイベントを効率的に計算機上に再現することが出来る「カスケード型超並列シミュレーション」を適用し、同一結晶中の 2 状態構造間の構造遷移経路を探索した。

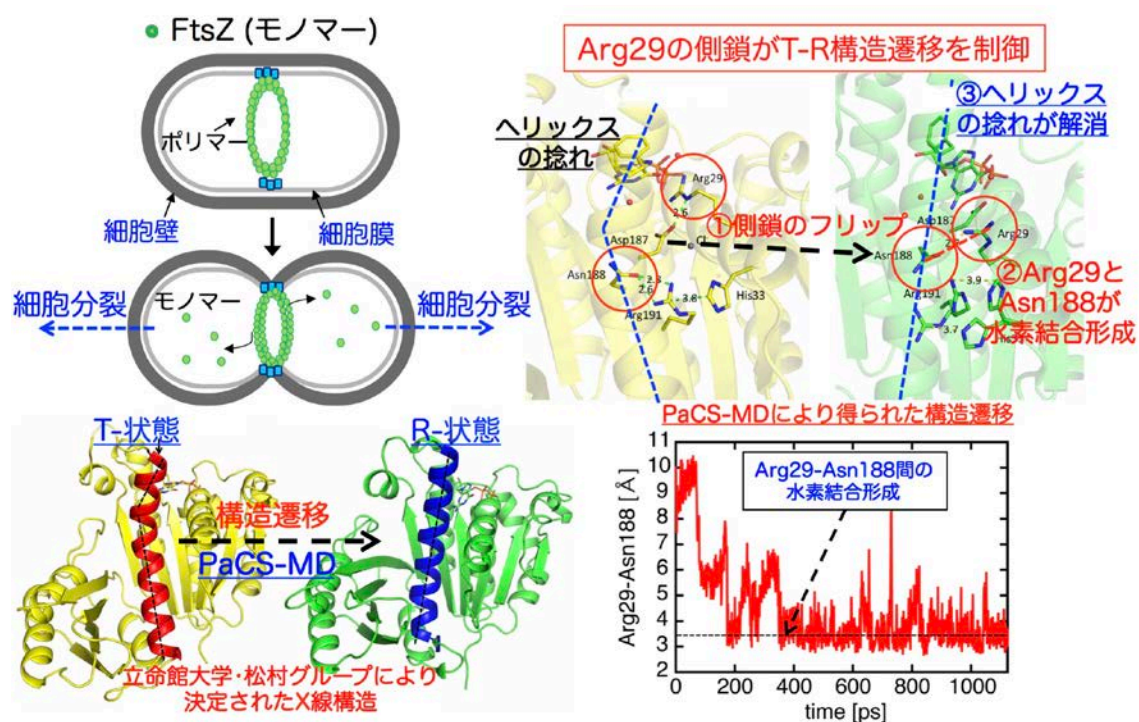


図 3: 黄色ブドウ球菌由来の FtsZ モノマーの状態遷移メカニズム

我々の研究室で開発しているレアイベント探索法である PaCS-MD により得られた遷移経路を解析したところ、状態遷移における重要なアミノ酸残基のメカニズムを突き止めることができた。具体的には、29 番目のアルギニン残基に注目したところ、側鎖のフリップがスイッチとなり状態遷移を制御していることが明らかになった。図 3 に示す

様に、Arg29 の側鎖がフリップすることで Asn188 の側鎖と水素結合を形成し、FtsZ 中央に存在しているヘリックスが捩れた構造から捩れが解消された直線的な形状に構造遷移するメカニズム解明した。また、PaCS-MD により抽出した Arg29-Asn188 の水素結合距離の時系列データ(図 3・右下)から、T-R 状態遷移に伴い Arg29-Asn188 間に水素結合が形成されていることが分かる。更に、FtsZ モノマーは 2 構造間の構造遷移において基質である GDP を段階的に認識・解除していることを解明し、中間体構造を経て多段階に状態遷移していることも突き止めた。

(4) 紫外線損傷 DNA におけるフリッピング機構の理論的研究

DNA は紫外線によって損傷を受けることが知られている。そして、受けた損傷が修復されないで DNA の転写や複製の障害、植物の静緒障害などの原因となる。生物はこの損傷を修復する機能を有する光回復酵素 (PHR) という酵素を保有している。PHR は紫外線損傷 DNA を認識して結合し、光誘起電子移動反応によって修復する。紫外線損傷 DNA において PHR と結合するために、損傷部位が二重らせん構造から外れるフリッピングと呼ばれる現象が起こることが X 線結晶構造解析により明らかになった。しかし、フリッピングがどの段階で生じているかについては明らかではない。

本研究では、フリッピングが DNA が損傷した際に起こっているのか蛋白質との相互作用によって起こっているのかを明らかにするために分子動力学 (MD) 計算と量子化学計算を用いて、その反応機構を調べた。MD 計算の結果、DNA 単体ではフリッピングは生じなかった。さらに、損傷部位と核酸間の相互作用エネルギーを量子化学計算によって見積もった結果、損傷部位と隣接する核酸間の相互作用エネルギーが $< -10 \text{ kcal mol}^{-1}$ であった。以上のことから紫外線損傷部位は隣接する核酸と強く相互作用しており、DNA 単体ではフリッピングは生じず、フリッピングを起こすためには外部からの力が必要であることを明らかにした。本研究結果は、Biophysics and Physicobiology に採択された。

[3] . 教育

【講義】

重田育照、計算物理学 2、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、計算物理学 3、物理学類専門科目、秋 ABC

庄司光男、生物物理科学、物理学類専門科目、春 ABC

【卒業研究発表】

木間塚政人、「分子動力学法を用いた不凍蛋白質-水分子間相互作用解析」

山崎笙太郎、「シアン耐性酸化酵素における反応機構についての理論的研究」
石井優輝、「FtsZ 繊維の構造変化についての分子動力学解析」

【博士論文発表】

前川慎太郎、「First-Principles Studies on Physical Properties of Optical Materials and Biomaterials

【4】. 受賞、外部資金、知的財産権等

【受賞】

原田隆平、若手招待講演賞、第54回日本生物物理学会、2016年11月26日

佐藤皓允、学生発表賞、第54回日本生物物理学会、2016年11月27日

【外部資金】

(1) 研究代表者

1. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究、重田育照（代表者）（平成26～30年度）「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
2. 基盤研究C：庄司光男（代表者）（平成26年～28年度）「トレオニン合成酵素の全反応機構の理論的解明」
3. 若手研究（A）：原田隆平（研究代表者）（平成28年～30年度）「Gタンパク質共役受容体におけるシグナル伝達機構の解明」

(2) 分担

1. 挑戦的萌芽研究：重田育照（分担者）（代表者：岡野泰則 大阪大学教授）（平成27～28年度）「メゾスケール空間内移動速度論創成のための挑戦的研究」
2. 特別推進研究：庄司光男（分担者）（代表者：沈建仁 岡山大学教授）（平成24～28年度）「光合成系IIにおける水分解反応の学理解明」

【知的財産権】

1. [国際特許] 特許名: Information Processing Apparatus and Simulation Method, 発明者: Tomotake Nakamura, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, 出願日: 2016年8月4日, 特許庁: US(米国), 申請番号: 15/228,540
2. [国際特許] 特許名: Information Processing Apparatus and Index Dimension Extracting Method, 発明者: Tomotake Nakamura, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, 出願日: 2016年8月4日, 特許庁: US(米国), 申請番号: 15/228,873

【5】． 研究業績

【査読付き論文】

1. J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, "Identification of the key interactions in structural transition pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*", *J. Struct. Biol.* **198**, 65-73 (2017).
2. Y. Kitagawa, M. Asaoka, Y. Natori, K. Miyagi, R. Teramoto, T. Matsui, Y. Shigeta, M. Okumura, M. Nakano, "Theoretical study on relationship between spin structure and electron conductivity of one-dimensional tri-nickel (II) complex", *Polyhedron*, in press (2017).
3. W. Naito, N. Yasuda, T. Morimoto, Y. Shigeta, H. Takaya, I. Hisaki, H. Maeda, "Doubly N-Methylated Porphyrinoids", *Org. Lett.*, **18**, 3006-3009 (2016).
4. S. Maekawa, M. Krzysztof, Y. Shigeta, "Refractive Indices of Organo-Metallic and -Metalloid Compounds: A Long-Range Corrected DFT Study", *J. Comp. Chem.* **37**(32), 2759-2769 (2016).
5. S. Negoro, Y. Kawashima, N. Shibata, T. Kobayashi, T. Baba, Y.-H. Lee, K. Kamiya, Y. Shigeta, K. Nagai, I. Takehara, D.-I. Kato, M. Takeo, Y. Higuchi, "Mutations affecting the internal equilibrium of the 6-aminohexanoate-dimer hydrolase reactions", *FEBS Lett.*, **590**(18), 3133-3143 (2016).
6. R. Yamakado, S. Sato, Y. Shigeta, H. Maeda, "Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-type Receptor-Anion Complexes", *J. Org. Chem.*, **81**, 8530-8536 (2016).
7. S. Maekawa, R. Sato, K. Hirao, Y. Shigeta, "Solvent effects on excited-state electron transfer rate of pyrene-labeled deoxyuridine: A theoretical study", *Chem. Phys. Lett.*, **644**, 25-30(2016).
8. M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM calculations of the CaMn_4O_5 cluster in the oxygen-evolving complex of photosystem II: comparisons with EXAFS structures", *Chem. Phys. Lett.*, 658, 354-363 (2016).
9. Y. Abe, M. Shoji, Y. Nishiya, H. Aiba, T. Kishimoto, K. Kitaura, "Reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 9811-9822 (2017).
10. W. Tanaka, M. Shoji, F. Tomoiike, Y. Ujiie, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, "Molecular Mechanisms of Substrate Specificities of Uridine-Cytidine Kinase", *Biophys. Physico.*, **13**, 77-84 (2016).
11. R. Hadara, Y. Takano, Y. Shigeta, "TaBoo SeArch(TBSA) algorithm with a modified inverse histogram for reproducing biologically relevant rare-events of proteins", *J. Chem. Theoret. Comp.*, **12**, 2436-2445 (2016).
12. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, "A Fast Convergent Simulated Annealing Algorithm for Protein-Folding: Simulated Annealing Outlier FLOODing (SA-OFLOOD) Method", *Bull. Chem.*

Soc. Jpn., **89** (11), 1361-1367 (Cover).

13. R. Harada, Y. Shigeta, "Efficient Conformational Search Based on the Structural Dissimilarity Sampling: Applications to Reproductions of Structural Transitions in Maltodextrin Binding Protein", *J. Chem. Theoret. Comp.*, **13**(3), 1411-1423(2017).
14. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Common Folding Processes of the Fast-Folding Proteins: Partial Formations of Secondary Structures Initiate the Immediate Protein Folding", *J. Comp. Chem.* **38** (Front Cover), 790-797(2017).
15. R. Harada, Y. Shigeta, "How does the number of initial structures affect the conformational sampling efficiency and quality in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)?", *Chem. Lett.*, **46**, 862-865 (2017)
16. R. Sato, H. Kito-Nishioka, T. Yanai and Y. Shigeta., "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Process of 9,10-diphenylanthracene in Solution", *Chem. Lett.*, **46** (2017).
17. R. Sato, R. Harada and Y. Shigeta., "Theoretical analyses on a flipping mechanism of UV-induced DNA damage", *Biophys. Physico.*, **13**, 311-319 (2016).
18. R. Yamakado, R. Sato, Y. Shigeta and H. Maeda, "Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-Type Receptor-Anion Complexes", *J. Org Chem.*, **81**, 8530-8536 (2016).
19. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda and H. Maeda, "Cooperatively Interlocked [2+1]-Type π -system-Anion Complexes", *Chem. Eur. J.*, **23**, 4160-4168 (2017).

【国際会議発表】

1. 招待講演

1. Y. Shigeta, "A consistent scheme for accurately estimating acid dissociation constant (pK_a) and redox potential"(Invited), *Fourth Changsha International Workshop on Theoretical and Computational Chemistry with Materials 2016*, June 10th-12th, Hunan, China.
2. M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, "Reaction mechanisms for the S2 to S3 transition in the oxygen-evolving complex of photosystem II" (Invited), *AWEST 2016*, June 19-21, Awaji island, Hyogo, Japan.
3. Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions" (Invited), *Shanghai Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics*, Jul. 23th-26th 2016, Shanghai, China.
4. Y. Shigeta, "Efficient Conformational Search Methods for Protein Folding Problems" (Invited), *The 9th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP 2016)*, Jul. 17th-22nd 2016, Grand Forks, North Dakota, USA.

5. M. Shoji, H. Isobe, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, Y. Shigeta, Y. Takano, "Electronic structures of the synthetic model of the photosynthetic oxygen-evolving complex" (poster, **Invited**), *VUVX satellite workshop*, Jul. 1st 2016, University of Zurich, Zurich, Switzerland.
6. R. Harada, Y. Shigeta, "Developments of Efficient Conformational Sampling Methods for Reproducing Biologically Rare Events" (**invited**), *The 54th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan*, Nov. 25th 2016, Tsukuba, Japan.

2. 一般講演

1. S. Maekawa, M. Krzysztow, Y. Shigeta, "Refractive Indices of Organo-Metallic and -Metalloid Compounds: A Long-Range Corrected DFT Study" (**Oral**), *Asian Photochemistry Conference*, Dec. 4th-8th 2016, Singapore.
2. Y. Shigeta, K. Kamiya, T. Sugimura, "Intramolecular Stereodynamic Effects on Ketene-Olefin [2 + 2] Cycloadditions of 2,4-Pentanediol Tether" (**Poster**), *Stereodynamics 2016*, Nov. 6th-11th 2016, Taipei, Taiwan.
3. K. Kamada, Y. Kitagawa, R. Kishi, M. Nakano, R. Sato, Y. Shigeta, "Control of multiple spin exciton states by synergetic studies of theory and experiment" (**Oral**), *1st International Symposium on Photosynergetics*, June 2nd-4th 2016, Osaka, Japan.
4. M. Shoji, "A quantum chemical study of the glycine formation reactions in interstellar medium" (Oral), *ABC workshop*, Mar. 21-23 2017, Hiroshima, Japan.
5. M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, "Large-Scale QM/MM study on the oxygen-evolving complex of photosystem II" (poster), *79th Harden Conference*, Apr. 16th-20th 2016, Innsbruck, Austria.
6. R. Sato, K. Kamada, R. Kishi, Y. Kitagawa, M. Nakano, Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Photon-upconversion of 9,10-Diphenylanthracene Derivatives via Triplet-triplet Annihilation Mechanism in Solvent" (**Poster**), *Asian Photochemistry Conference*, Dec. 4th-8th 2016, Singapore.
7. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, "On the Flipping-out mechanism of the UV-induced DNA damage", (**Poster**), *The 54th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan*, Nov. 27th 2016, Tsukuba, Japan
8. R. Sato, K. Kamada, Y. Kitagawa, M. Nakano, Y. Shigeta, "Theoretical Analysis of Triplet-Triplet Annihilation Based Photon Up-Conversion Mechanism in Solvent" (**Poster**), *1st International Symposium on Photosynergetics*, June 2nd-4th 2016, Osaka, Japan.
9. K. Kidachi, Y. Komatsu, Y. A. Sato, M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, Y. Aikawa, M. Umemura, "A theoretical study of glycine formation reactions in interstellar medium" (poster),

the 57th Sanibel Symposium, Feb. 19th-24th 2017, Georgia, USA.

10. Bui My *et al.* (**Poster**), *The 57th Sanibel Symposium*, Feb. 19th-24th 2017, Georgia, USA.
11. Bui My *et al.* (**Poster**), *The 77th Okazaki Conference Series: International Symposium on Ultrafast Dynamics in Molecular and Material Sciences*, Mar. 6th-8th Okazaki, Japan.
12. H. Kitoh-Nishioka and Y. Shigeta, "Singlet Fission Couplings Calculated with Complete-Active- Space Self-Consistent Field (CASSCF) Theory" (**Poster**) *The 57th Sanibel Symposium*, Feb. 19th-24th 2017, Georgia, USA.
- A. Sato, "Ly alpha Irradiation in the Early Phase Milky Way Galaxy Responsible for Initiating Homochirality" (**Oral**), *Formation of the Solar System and the Origin of Life*, Feb. 20th-24th 2017, Leiden, Netherland.

【国内学会・研究会発表】

1. 招待講演

1. 庄司光男、「光合成酸素発生中心の電子・スピン状態の理論解析」(招待講演), SEST2016, 2016年11月11日、大阪市立大学.
2. 重田育照、「理論計算によるタンパク質の機能解析と制御：最近の進展」、分子研理論・計算領域セミナー、May 19th 2016、分子科学研究所、岡崎、愛知.

2. その他の発表

1. 庄司光男、磯部寛、山口兆「光化学系 II 酸素発生中心(PSII-OEC)における S2-S3 状態変化についての理論的研究」(**ポスター**)、第 89 回日本生化学会大会、2016 年 9 月 26 日、東北大学、仙台.
2. 庄司光男、「星間ダスト上でのアミノ酸生成機構についての理論的研究」(口頭)、宇宙生命計算科学連携拠点第 2 回ワークショップ、2016 年 4 月 27 日~28 日、筑波大学.
3. 栢沼愛、「星間空間におけるアミノ酸生成反応の第一原理計算」、ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第 1 回公開シンポジウム: 惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して、2017 年 3 月 6 日、神戸大学.
4. 原田隆平、重田育照、「カスケード型分子動力学計算によるタンパク質の折りたたみ過程解析」(口頭)、第 43 回生体分子化学討論会、2016 年 5 月 24 日~25 日、名古屋.
5. 原田隆平、鷹野優、重田育照、"Universality of protein folding investigated by a rare-event search method" (**ポスター**)、第 16 回蛋白質科学会、2016 年 5 月 7 日~9 日、福岡.
6. 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、中野雅由、重田育照、「溶媒中における三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構に関する研究」、第 19 回理論化

学討論会、2016年5月23日～25日.

7. 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、北河康隆、中野雅由、重田育照、「A Theoretical Studies on Up-conversion Mechanism via Triplet-Triplet Annihilation in Solution」、*TIA”かけはし”*ポスター交流会、2016年8月30日.
8. 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、北河康隆、中野雅由、重田育照、「三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構に関する理論的研究」、*第10回分子科学討論会*、2016年9月13日～15日.
9. 佐藤竜馬、原田隆平、重田育照、「紫外線損傷 DNA における Flipping 機構」、*第54回日本生物物理学会年会*、2016年11月25日～27日.
10. 佐藤竜馬、重田育照、「9,10-ジフェニルアントラセンおよびその誘導体に対する三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構の理論的研究」、*高次複合応答分子システムの開拓と学理の構築 第5回公開シンポジウム・第5回若手セミナー*、2017年1月20日～21日
11. 佐藤皓允、「星間空間における円偏光吸収反応による L 型アミノ酸過剰生成の計算科学的検証」、*宇宙生命計算科学連携拠点第2回ワークショップ*、2016年4月27日～28日、筑波大学.
12. 鬼頭(西岡)宏任、「有機半導体のエキシトン/キャリア輸送現象の理論解析」(ポスター)、*学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 第8回シンポジウム*、会場: THE GRAND HALL (品川)、2016年7月14日～15日.
13. 鬼頭(西岡)宏任、「Studies on Charge Transfers in Bio-system and Organic Semiconductor by Using Fragment Molecular Orbital Methods」、*TIA”かけはし”*ポスター交流会、2016年8月30日.
14. 鬼頭(西岡)宏任、重田育照、「有機ナノ結晶における励起状態ダイナミクスの理論研究」(ポスター)、*第10回分子科学討論会*、2016年9月13日～15日.

【著書、解説記事等】

1. 原田隆平、最近の研究から「カスケード型超並列シミュレーションに基づく遷移経路探索法」、*分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」*, **18**, 159-167(2016).
2. 松井亨、喜屋武茜、庄司光男、重田育照、「プロトンの水和自由エネルギー：酸解離定数および標準水素電極電位の高精度計算」、*量子水素の科学 (特集号)*、*日本コンピュータ化学会誌 (invited review)*、**15**(5)、184-191 (2016).

【6】． シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 重田育照、第 77 回岡崎コンファレンス「Ultrafast dynamics in Molecular Science and Material Science」、牛山浩、重田育照、高橋聡、藤井幹也、山下雄史、斉藤真司、Mar 6th-8th 2017, 岡崎コンファレンスセンター.

【7】． 社会貢献・国際貢献

【集中講義】

1. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、愛媛大学大学院医系研究科. (2016 後期)
2. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、 東京大学大学院工学系研究科. (2016 後期)
3. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、九州大学大学院理学研究科.(2016 前期)

【その他】

1. Yasuteru Shigeta、Outstanding Reviewers for Physical Chemistry Chemical Physics in 2016. Royal Chemical Society (2016).
Royal Chemical Society の発刊している「Physical Chemistry Chemical Physics」において、数多くの査読を行い、2016 年度の Outstanding Reviewers として PCCP 誌に掲載された (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017, **19**, 8140)

【8】． その他

とくになし